
科研人员研发大规模量子微扰计算软件

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/40977.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

科研人员研发大规模量子微扰计算软件

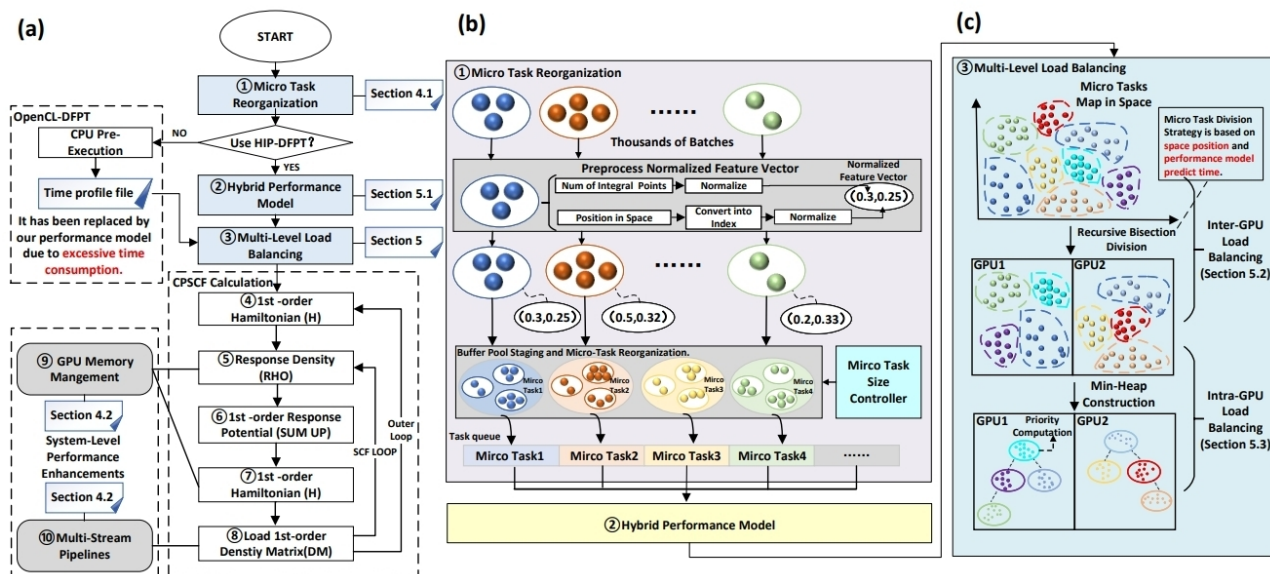
。量子微扰理论是研究材料、分子体系响应性质的重要理论工具，可揭示声子谱、极化率、拉曼光谱等微观物理特性，在材料科学、凝聚态物理和分子模拟等领域具有重要应用价值。

近期，中国科学院计算机网络信息中心团队研发了面向异构GPU集群的大规模量子微扰计算软件HIP-DFPT。该软件面向量子微扰计算中的不规则负载特征，提出微任务重组、GPU内存优化和多流异步流水等方法，将大量细粒度计算任务重组为更适合GPU执行的微任务单元，提升线程利用率和数据访问效率，降低通信与数据传输开销。

科研团队团队提出了面向复杂分支代码的AI性能建模方法，仅采样少量运行数据即可快速预测任务执行时间，并设计混合多级负载均衡算法，实现节点间、GPU内动态调度的协同优化。实验结果表明，HIP-DFPT可扩展至8192张国产GPU，并支持20万原子规模体系的全电子精度模拟，原子吞吐量提升70%，验证了该软件在大规模量子微扰计算中的并行扩展能力和工程应用潜力，为复杂科学计算程序在异构GPU集群上的智能化优化提供了新的技术路径。

相关研究成果被IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems（CCF A类期刊）录用。研究工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金和中国科学院相关项目的支持。

[论文链接](#)



HIP-DFPT架构图

研究团队单位：计算机网络信息中心

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发